

Zur Berücksichtigung von Vorgängen im Mikrobereich kristalliner Werkstoffe bei der Entwicklung von Stoffmodellen

Steck, Elmar

Veröffentlicht in:
Jahrbuch 1995 der Braunschweigischen
Wissenschaftlichen Gesellschaft, S.115-130



Verlag Erich Goltze KG, Göttingen

ELMAR STECK, Braunschweig

Zur Berücksichtigung von Vorgängen im Mikrobereich kristalliner Werkstoffe bei der Entwicklung von Stoffmodellen

The macroscopic behaviour of crystalline materials under mechanical or thermal loadings is determined by processes in the micro-region of the material. The stochastic character of these mechanisms can be considered by modelling them as stochastic processes which result in Markov-chains.

By a combination of models on the basis of molecular dynamics and cellular automata it seems possible to simulate numerically the formation of internal structures during the deformation processes which influence the macroscopical behaviour substantially.

Das makroskopische Verhalten kristalliner Werkstoffe bei mechanischer oder thermischer Belastung wird von Vorgängen im Mikrobereich des Materials bestimmt. Der stochastische Charakter dieser Vorgänge kann durch die Modellierung als stochastischer Prozeß erfaßt werden, der auf Markov-Ketten führt.

Mit Hilfe einer Kombination von Modellen auf der Basis der Molekulardynamik und der zellulären Automaten erscheint es möglich, die Bildung innerer Strukturen während der Verformungsvorgänge, die das makroskopische Verhalten wesentlich beeinflussen, numerisch zu simulieren.

Einleitung

Metallische Werkstoffe zeigen, wie auch andere kristallin aufgebaute Materialien, bei Beanspruchung durch mechanische Lasten typische makroskopische Antworten, die durch die Vorgänge im Mikrobereich hervorgerufen sind. Bild 1 zeigt ein typisches zyklisches Spannungs-Dehnungsdiagramm, bei dem die Dehnschwingbreite konstant gehalten wurde. Man erkennt zyklische Verfestigung und den Bauschinger-Effekt, der sich darin ausdrückt, daß bei Lastumkehr plastisches Fließen bei wesentlich niedrigeren Spannungen eintritt, als denjenigen, aus denen entlastet wurde. Für die technische Anwendung der metallischen Werkstoffe ist die Erfassung derartiger Vorgänge in mathematischen Werkstoffmodellen außerordentlich wichtig.

Die Entwicklung der numerischen Methoden zur Behandlung kontinuumsmechanischer Anfangs-Randwertprobleme ist weit fortgeschritten. Wenn zutreffende mathematische Darstellungen des Werkstoffverhaltens vorhanden sind, können mit diesen Verfahren Bauteile und Strukturen in allen Bereichen der Technik ausgelegt und ihr Verhalten bei komplexen Belastungsvorgängen numerisch simuliert werden.

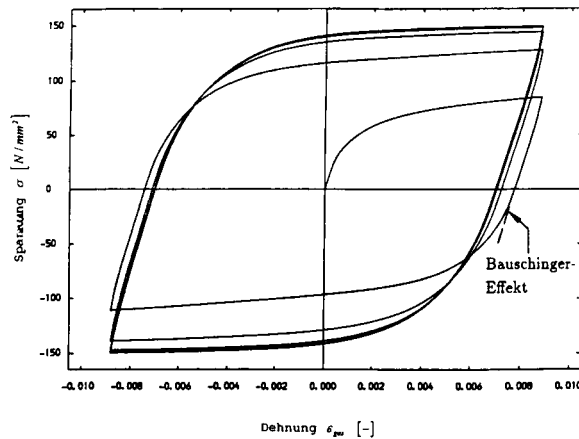


Bild 1
Zyklisches Spannungs- Dehnungsdiagramm
für 304 Stainless-Steel. $T = 600\text{ °C}$.

Die Bewegung von Versetzungen ist der wesentliche Träger der plastischen Verformung bei metallischen Werkstoffen. Im folgenden wird ein stochastisches Modell erläutert, das das Ziel hat, Verfestigungs- und Entfestigungsvorgänge im Material in Form von Markov-Ketten zur erfassen.

Im Verlauf des Verformungsprozesses ordnen sich die Versetzungen in einer Hierarchie von Strukturen wie Mauern, Adern, Bündel oder Zellen an. Diese Strukturbildung beeinflusst das makroskopische Verhalten des Materials wesentlich. Über das Prinzip der zellulären Automaten, in Verbindung mit Ansätzen der Molekulardynamik, wird diese Strukturbildung numerisch simuliert.

Mechanismen im Mikrobereich

Bild 2 zeigt schematisch einen zweidimensionalen Ausschnitt aus dem Gefüge geordneter Substitutionsmischkristalle [1]. Man erkennt eine Vielfalt von Störungen des regelmäßigen Gitteraufbaus, von denen die Versetzungen für das plastische Verhalten die wichtigsten Größen sind, da sie als linienförmige Gitterstörungen das Abgleiten von Gitterebenen gegeneinander sehr erleichtern und dadurch die Fließgrenze realer Werkstoffe gegenüber derer für Einkristalle erheblich absenken.

Die Versetzungsbewegung und damit die durch äußere Lasten verursachten Verformungen werden durch zwei wichtige Aktivierungsvorgänge bestimmt. Das ist einmal die Spannungsaktivierung, die durch die äußeren Lasten hervorgerufen wird, und zum anderen die thermische Aktivierung, die bei höheren Temperaturen die durch die Belastung hervorgerufenen Versetzungsbewegungen und damit die plastischen Verformungen unterstützt.

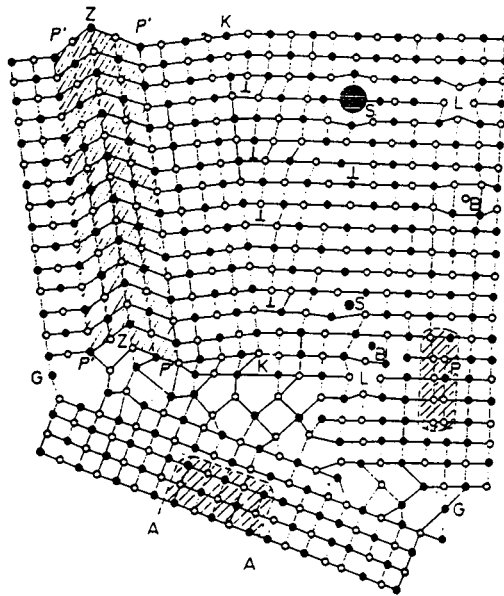


Bild 2

Zweidimensionaler Ausschnitt aus einem schematischen Gefüge
von geordneten Substitutionsmischkristallen (G. Petzow [1]).

L Leerstelle; B Zwischengitteratom; S Fremdatom; \perp Versetzung

Bild 3 zeigt schematisch die im Mikrobereich der Versetzungsbewegung entgegenstehenden Hindernisse in Form von Hindernispotentialen U^* , die durch die Temperatur gegebene mögliche Lage einer Versetzung relativ zu diesen Hindernispotentialen und die Wirkung einer von außen angelegten Spannung und einer Temperaturerhöhung auf die energetischen Verhältnisse an dieser Versetzung. Man erkennt, daß das Potential U^* der äußeren Kräfte durch Überlagerung dasjenige der vorhandenen Hindernisse so verändert, daß die Versetzungsbewegung in Richtung der angelegten Spannung wahrscheinlicher wird, als diejenige in entgegengesetzter Richtung, und daß die thermische Aktivierung diesen Vorgang unterstützt.

Die der Versetzungsbewegung entgegenstehenden Hindernisse sind einmal durch die kristalline Struktur des Werkstoffs selbst gegeben, zum andern können Fremdatome und Korngrenzen als Hindernisse wirken. Mit die wichtigste Ursache der Behinderung der Versetzungsbewegung sind aber die Versetzungen selbst. Bei plastischer Verformung entstehen ständig neue Versetzungen. Hierdurch wird anfänglich die Fähigkeit des Werkstoffes, sich plastisch zu verformen, gesteigert. Mit wachsender Versetzungsdichte tritt aber eine gegenseitige Beeinflussung der Gitterstörungen auf, die zur isotropen Verfestigung führt.

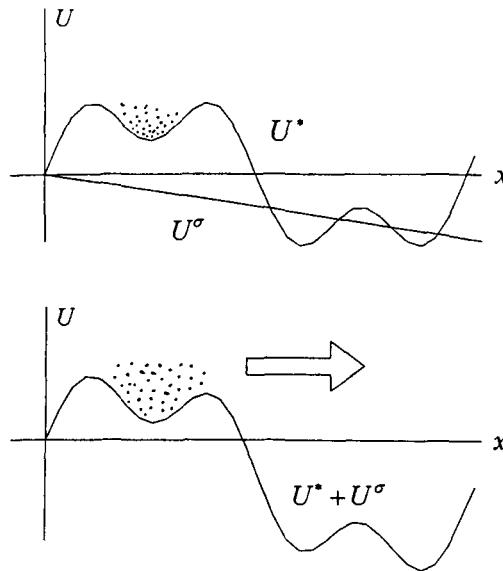


Bild 3
Spannungs- und thermische Aktivierung

Mit den durch die plastischen Verformungen verbundenen Gitterverzerrungen wird im Werkstoff elastische Energie gespeichert, die ebenfalls die Bewegung der sie erzeugenden Versetzungen behindert. Man nennt diesen Vorgang kinematische Verfestigung. Die inneren Spannungen unterstützen jedoch Versetzungsbewegungen in der entgegengesetzten Richtung und bewirken damit z.B. den Bauschinger-Effekt.

Bei höheren Temperaturen – oberhalb der halben Schmelztemperatur des Werkstoffs, gemessen in Kelvin – treten thermisch aktivierte Ordnungsvorgänge in den Kristalliten auf, die die gegenseitige Behinderung der Versetzung vermindern und damit makroskopisch zu einer Entfestigung führen.

Für diese Vorgänge kennzeichnende Größen sind in Bild 4 dargestellt, das eine Versetzung zeigt, die durch andere Versetzungen behindert ist. Das schraffierte Gebiet ist ein Maß für das sogenannte Aktivierungsvolumen ΔV , das bei wachsender isotroper Verfestigung an Größe abnimmt. b ist hierbei der Burgersvektor, der durch seine Lage zur Versetzungslinie den Charakter der Versetzung bestimmt. ρ_w ist die Dichte der sogenannten Waldversetzungen, d.h. der Versetzungen die die anderen in ihrer Bewegung behindern.

Tabelle I zeigt den Zusammenhang zwischen Aktivierungsvolumen und den wichtigsten Verformungsmechanismen für verschiedene Bereiche der homologen Temperatur T/T_m

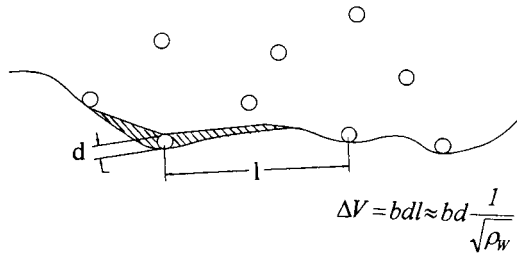


Bild 4
Aktivierungsvolumen

| Verformungs- mechanismus | Temperatur- bereich T/T_m | Aktivierungsvolumen |
|-------------------------------------|--------------------------------|---|
| Klettern | $> 0,5$ | b^3 ; der Wert bleibt während der Verformung konstant |
| Bewegung von Versetzungssprüngen | $> 0,5$ | $10-1000b^3$; der Wert des Aktivierungsvolumens sinkt während der Verformung |
| Quergleiten | $0,2-0,4$ | $10-100b^3$; der Wert bleibt während der Verformung annähernd konstant |
| Schneiden von Versetzungen | $> 0,3$ | $> 1000b^3$; das Aktivierungsvolumen wird durch die Zunahme von Waldversetzungsdichte mit der Verformung kleiner |

Das stochastische Werkstoffmodell

Wie aus der Beschreibung der für plastische Verformungen maßgebenden Vorgänge im Mikrobereich zu erkennen ist, besitzen diese einen stark stochastischen Anteil. Bild 5 zeigt an einem vereinfachten Fall für Vorgänge bei hohen Temperaturen unter Berücksichtigung nur isotroper Verfestigung das verwendete stochastische Modell.

Über der Zustandsachse, die die Stärke der isotropen Verfestigung σ^{iso} und damit die Höhe der der Versetzungsbewegung entgegenstehenden Hindernisse darstellt, ist die Verteilung der „Fließeinheiten“ (Versetzungen, Versetzungspakete oder Korngrenzen) über der Hindernisstärke aufgetragen. Die Wirksamkeit der von außen angelegten Spannung wird durch die Verfestigungsspannung reduziert, so daß die Versetzungsbewegung nur durch die effektive Spannung

$$\sigma_{eff} = \sigma - \sigma^{iso} \quad (1)$$

bewirkt wird.

In Abhängigkeit von σ^{iso} und σ_{eff} wird eine Verfestigungswahrscheinlichkeit

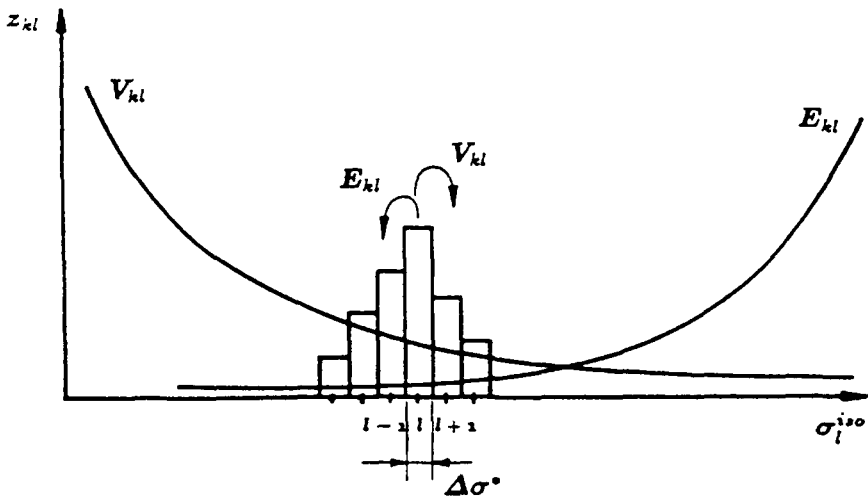


Bild 5

Stochastisches Modell für Hochtemperaturplastizität

$$V_{k,l} = c_l \Delta t \exp \left(- \frac{U_o + \Delta V \sigma_l^{iso}}{k_B T} \right) \sinh \left(- \frac{\Delta V |\sigma_l^{eff}|}{k_B T} \right) \quad (2)$$

angesetzt [2]. Diese Übergangswahrscheinlichkeit beruht auf der Voraussetzung daß die thermische Aktivierung der Versetzungen gemäß einer Boltzmann-Verteilung angesetzt werden kann. U_o ist hierbei die Aktivierungsenergie der Selbstdiffusion, die die Hinderungsverteilung darstellt, die durch den Aufbau des Kristalles gegeben ist, k_B die Boltzmannkonstante, Δt der für die Beschreibung der zeitlichen Entwicklung des Prozesses angenommene Zeitschritt und c_l eine experimentell zu bestimmende Konstante.

Man erkennt, daß die Übergangswahrscheinlichkeit von einem bestimmten Verfestigungszustand auf den nächsthöheren mit wachsender Verfestigung geringer wird.

Der Verfestigung entgegen wirkt ein Entfestigungsprozess gemäß

$$E_{k,l} = c_2 \Delta t \exp \left(- \frac{\alpha_1 U_o}{k_B T} \right) \exp \left(- \frac{\beta_1 \Delta V \sigma_l^{iso}}{k_B T} \right) \quad (3)$$

der thermisch aktiviert ist und nicht von der äußeren Spannung abhängt. c_2 , α_1 und β_1 sind wieder experimentell zu bestimmende Konstanten. Da die Stärke der Gitterverspannungen mit wachsender Verfestigung ansteigt, und diese den Entfestigungsprozeß unterstützen, werden die Übergangswahrscheinlichkeiten für die Entfestigung mit wachsender Verfestigung größer.

Das Modell simuliert also Verfestigung und Erholung durch Übergänge von Versetzungen an einer Hindernisstärke σ_{i+1}^{iso} zu höheren Hindernissen σ_{i+1}^{iso} und niedrigeren Hindernissen σ_{i+1}^{iso} . Die Wahrscheinlichkeit, daß eine Fließeinheit in ihrem augenblicklichen Zustand verbleibt, ist durch

$$B_{i,i} = 1 - V_{i,i+1} - E_{i,i-1} \quad (4)$$

gegeben.

Die Übergangswahrscheinlichkeiten des Modells lassen sich in der stochastischen Matrix

$$\underline{SM} = \begin{bmatrix} E_{i-1,i-2} & 0 & 0 \\ B_{i-1,i-1} & E_{i,i-1} & 0 \\ V_{i-1,i} & B_{i,i} & E_{i+1,i} \\ 0 & V_{i,i+1} & B_{i+1,i+1} \\ 0 & 0 & V_{i+1,i+2} \end{bmatrix} \quad (5)$$

anordnen. Die Änderung der durch den Zustandsvektor \underline{z} gegebenen Struktur während eines Zeitschritts Δt ist durch die Markov-Kette

$$\underline{z}(t + \Delta t) = \underline{SM} \underline{z}(t) \quad (6)$$

gegeben. Bei konstanter Spannung und Temperatur (homogener Prozeß) ergibt sich für den Zustandsvektor nach n Zeitschritten

$$\underline{z}(t_0 + n\Delta t) = \underline{SM}^n \underline{z}(t_0) \quad (7)$$

Die durch Gleichung 4 gegebene stochastische Matrix läßt sich auf Hauptachsen transformieren und nimmt dann die Form

$$\underline{\tilde{SM}} = \underline{M}^{-1} \underline{SM} \underline{M} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{bmatrix} \quad (8)$$

an, wobei \underline{M} die Modalmatrix, d.h., die Matrix der spaltenweise angeordneten Eigenvektoren der Matrix \underline{SM} darstellt.

Die entsprechende Markov-Kette stellt sich dann in der Form

$$\underline{\tilde{z}}(t) = \underline{\tilde{SM}}^n \underline{\tilde{z}}(t_0) \quad (9)$$

dar. Da stochastische Matrizen einen größten Hauptwert 1 besitzen und alle anderen Eigenwerte dem Betrag nach kleiner als 1 sind, erkennt man, daß deren Beiträge mit wachsender Zeit abklingen, und der zum größten Eigenwert 1 gehörende Eigenvektor einen stationären Zustand kennzeichnet. Die Markov-Kette ist damit in der Lage, das sogenannte stationäre Kriechen darzustellen. Die übrigen Hauptwerte sind für transiente Vorgänge verantwortlich.

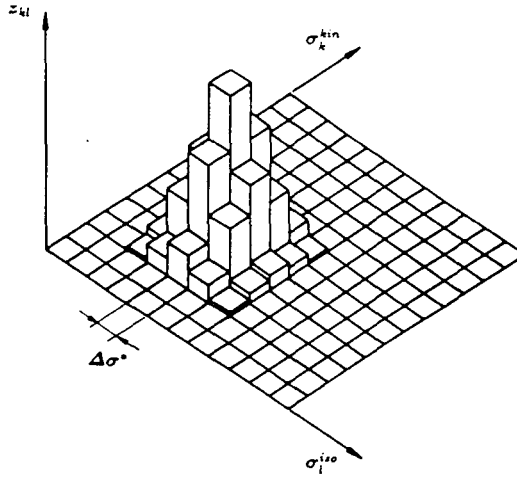


Bild 6
Erweiterung des stochastischen Modells

Eine Erweiterung des stochastischen Modells, die die gleichzeitige Berücksichtigung der Entwicklung der isotropen Verfestigung und der kinematischen Verfestigung zuläßt, zeigt Bild 6.

Isotrope und kinematische Verfestigung spannen eine Zustandsebene auf, die zuläßt, daß bei der Verteilung der Fließeinheiten ihr jeweils durch die beiden Verfestigungsarten gegebener Zustand berücksichtigt werden kann. Die hier für die Entwicklung der kinematischen und isotropen Verfestigung gegebenen Übergangswahrscheinlichkeiten berücksichtigen jeweils die durch die andere Verfestigungsart gegebenen Einflüsse [3].

Durch eine Mittelwertbildung [3] erhält man aus dem stochastischen Modell ein makroskopisches kontinuumsmechanisches Werkstoffmodell, das eine ähnliche Form annimmt wie andere in der Literatur vorgeschlagene Stoffmodelle:

Das Werkstoffverhalten wird durch eine Beziehung für die inelastische Dehnrage

$$\dot{\epsilon}_{ic} = C \exp \left(- \frac{U_o}{k_B T} \right) \sinh \left(\frac{\Delta V |\sigma - \sigma^{kin}|}{k_B T} \right) \exp \left(- \frac{\Delta V \sigma^{iso}}{k_B T} \right) \quad (10)$$

beschrieben, in der als innere Variable die augenblicklichen Werte für die kinematische und die isotrope Verfestigung auftreten.

Für diese inneren Variablen ergeben sich Entwicklungsgleichungen der Form

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}^{iso} = & b_1 \exp \left(\frac{U_o}{k_B T} \right) \sinh \left(\frac{\Delta V |\sigma - \sigma^{kin}|}{k_B T} \right) \exp \left(- \frac{\Delta V \sigma^{iso}}{k_B T} \right) \\ & - b_2 \exp \left(- \frac{\alpha_1 U_o - \beta_1 \Delta V \sigma^{iso}}{k_B T} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

für die innere isotrope Spannung und der Form

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}^{kin} = & b_3 \exp\left(\frac{U_o}{k_B T}\right) \sinh\left(\frac{\Delta V |\sigma - \sigma^{kin}|}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{\Delta V \sigma^{iso}}{k_B T}\right) \\ & - b_4 \exp\left(-\frac{\alpha_2 U_o - \beta_2 \Delta V \sigma^{kin}}{k_B T}\right) \end{aligned} \quad (12)$$

für die innere kinematische Spannung. Die Größen C , b_1 , b_2 , b_3 , b_4 , ΔV , a_1 , β_1 , a_2 , β_2 , σ_o^{iso} sind Werkstoffparameter, die durch Vergleich mit Versuchsergebnissen ermittelt werden müssen.

Der Parameteridentifikation, die darin besteht, daß die nichtlinearen gewöhnlichen Differentialgleichungen für veränderliche Parametersätze integriert und durch geeignete Optimierungsverfahren die optimalen Parametersätze gesucht werden müssen, muß besondere Aufmerksamkeit hinsichtlich der eingesetzten mathematischen Methoden geschenkt werden [4]. Die Bilder 7 bis 9 zeigen Ergebnisse derartiger Anpassungen. Bild 7 zeigt eine Anpassung an zyklische Versuche an Kupfer bei Raumtemperatur, bei der sieben Parameter anzupassen waren. Bild 8 zeigt den Vergleich zwischen experimentellen und durch das Modell gegebenen Kriechkurven für den Stahlwerkstoff SS 316L bei einer Temperatur von 750°C. Die Parameter wurden für die gegebenen Spannungen simultan angepaßt, so daß die berechneten Kurven mit einem einzigen Parametersatz gewonnen wurden. Bild 9 zeigt bei der gleichen Temperatur experimentelles und theoretisches Ergebnis eines Relaxationsversuchs.

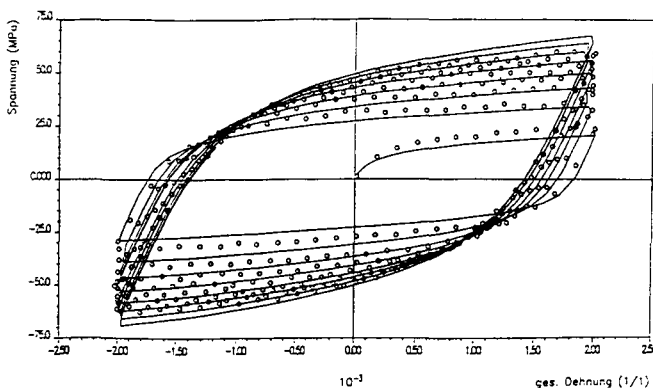


Bild 7

Modellanpassung an zyklische Versuche an Kupfer bei Raumtemperatur

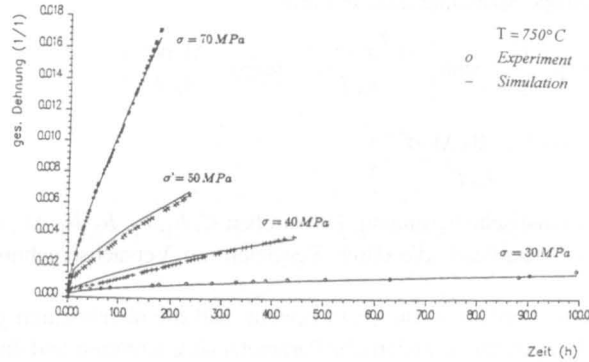


Bild 8
Modellanpassung an Kriechkurven für den Stahlwerkstoff SS 316L. $T=750^{\circ}\text{C}$.

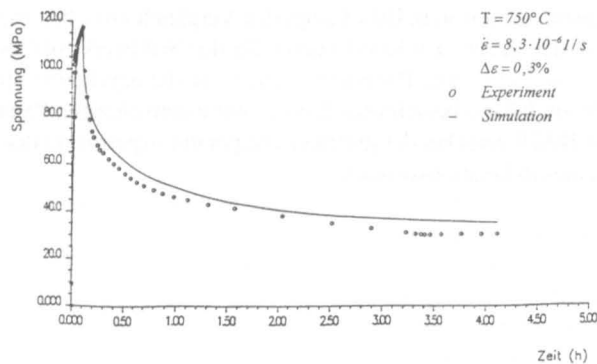


Bild 9
Ergebnis eines Relaxationsversuchs

Simulation der Entwicklung von Versetzungsstrukturen.

Sowohl bei einsinnigen als auch zyklischen plastischen Verformungen beobachtet man die Entwicklung von Versetzungsstrukturen z.B. in Form von Adern (Bild 10) oder Versetzungszellen (Bild 11), die in typischer Weise von Belastungsgeschichte und Beanspruchshöhe abhängen.

Da die Bildung dieser Versetzungsstrukturen das makroskopische Verhalten der Werkstoffe wesentlich beeinflusst, kann die Simulation dieser Selbstorganisationsvorgänge unter Umständen wertvolle Hinweise für die Wahl der Ansätze in den Werkstoffmodellen ergeben, die zur Beschreibung von Vorgängen im Mikrobereich herangezogen werden.

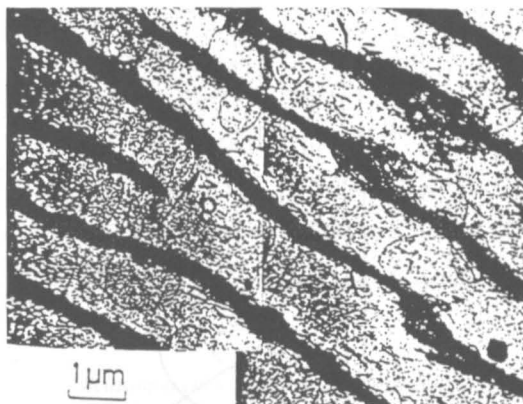


Bild 10
Adern nach Mughrabi

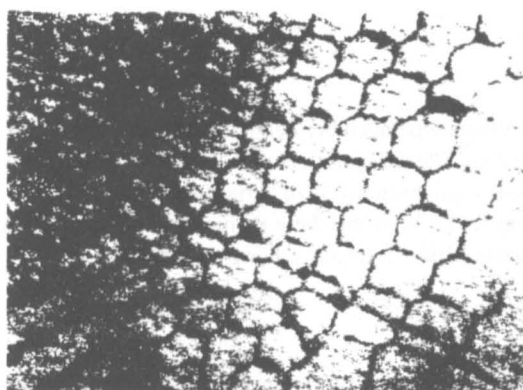


Bild 11
Zellen nach Honeycombe

Die Wechselwirkung einer Vielzahl gleicher Teilchen ist der grundlegende Gedanke bei der Definition eines zellulären Automaten. Es handelt sich dabei um eine Idealisierung physikalischer Systeme, bei der sowohl der Raum als auch die Zeit diskret sind. Jede Zelle kann bei der zeitlichen Entwicklung nur Werte (Zustände) aus einer endlichen Menge annehmen. Für alle Zellen gelten dieselben Entwicklungsregeln. Die Zustandsentwicklung einer Zelle hängt vom Zustand der Zelle selbst und den Zuständen ihrer Nachbarzellen ab. Ein Zellularautomat ist durch die vier folgenden Merkmale vollständig charakterisiert [5]:

1. Geometrie der Zellanordnung,
2. Definition der Nachbarschaft,
3. Definition der möglichen Zustände einer Zelle,
4. Entwicklungsregeln.

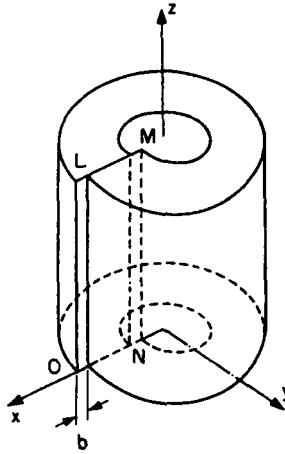


Bild 12
Stufenversetzung

Entgegen üblicher Voraussetzungen bei Zellularautomaten, bei denen der Zustand einer Zelle nur durch die Zustände der unmittelbaren Nachbarn beeinflusst wird, ist bei der Simulation von Versetzungsbewegungen zu berücksichtigen, daß die Versetzungen weitreichende Spannungsfelder besitzen, die z.B. für das kontinuumsmechanische Modell einer Stufenversetzung (Bild 12) folgende Form annehmen:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= -\frac{Gb}{2\pi(l-\nu)} \frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} & \sigma_{yy} &= \frac{Gb}{2\pi(l-\nu)} \frac{y(x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} \\ \sigma_{xy} &= -\frac{Gb}{2\pi(l-\nu)} \frac{y(x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} & \sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \quad \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0,\end{aligned}\quad (13)$$

G ist hierbei der Schubmodul, b der Burgersvektor und ν die Querkontraktionszahl.

Die Bilder 13 und 14 zeigen Ergebnisse einer Simulation, bei der nur ein Gleitsystem in horizontaler Richtung zugrundegelegt wurde. Das Modell setzt ein Raster von Rechteckzellen voraus, die mit Stufen- oder Schraubenversetzungen positiven oder negativen Vorzeichens besetzt sein können [6]. Die Übergangsregeln lauten: Eine positiv oder negativ besetzte Zelle wird eine leere Zelle, wenn die sich dort befindende Versetzung unter Einfluß der auf sie wirkenden Kräfte eine Nachbarzelle besetzt oder es zu einer Annihilation mit einer anderen Versetzung in der Nachbarschaft kommt. Die Schrittweite einer Versetzung ist immer eine Zelle pro Zeitschritt. Es sind als Zielfelder die Zellen rechts, links, oben oder unten möglich. Es handelt sich nach der Nachbarschaftsdefinition um eine 5er Nachbarschaft [7]. Für die Berechnung der Kräfte auf eine Versetzung ist eine größere Nachbarschaft notwendig, da Spannungsfelder von Versetzungen eine große Reichweite haben. Die Größe dieser Nachbarschaft ist durch die Vorgabe einer

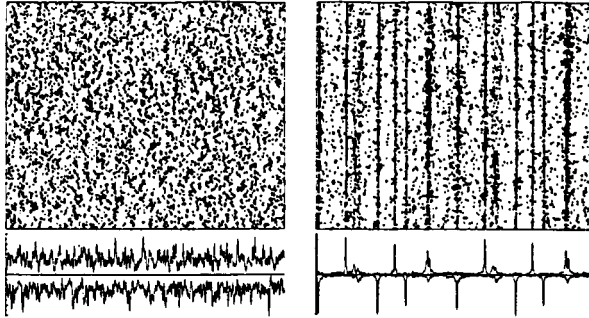


Bild 13
Relaxation einer Zufallsanfangsverteilung

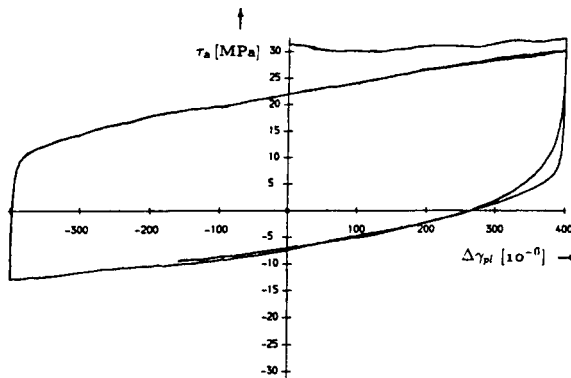


Bild 14
Erforderliche äußere Schubspannung bei dehnungsgesteuerter
zyklischer Simulation

Wechselwirkungsreichweite bestimmt, die so gewählt werden muß, daß die gegenseitige Beeinflussung der Versetzungen noch physikalisch zutreffend modelliert wird, aber der mit der Berechnung der Kräfte zwischen den Versetzungen verbundene Rechenaufwand minimiert wird.

Die Kräftebilanz entscheidet, ob und in welche Richtung sich eine Versetzung bewegt. Sie wird in jedem Zeitschritt für jede Versetzung i für beide Freiheitsgrade aufgestellt:

$$|F_a + \Sigma F_{ij}| > F_f \quad (14)$$

wobei F_a die durch die äußere Spannung σ_a verursachte Kraft ist, ΣF_{ij} die resultierende Kraft aus den Wechselwirkungen der betrachtenden Versetzung mit anderen Versetzungen. F_f ist eine Reibkraft, die der Bewegungsrichtung entgegengesetzt ist. Die Kräfte-

bilanz muß sowohl für die Hauptgleitrichtung als auch für die senkrecht dazu liegende Kletter- bzw. Quergleitrichtung berechnet werden.

Mit diesem Modell ist es möglich, die Dynamik einiger tausend Stufen oder Schraubenversetzungen auf parallelen Gleitebenen in Feldern beliebiger Größe zu berechnen. Untersuchungen mit Feldgrößen von $10\ \mu\text{m} \times 4\ \mu\text{m}$ und Versetzungsdichten von etwa $10^{14}\ \text{m}^{-2}$ zeigen, ausgehend von einer Zufallsanfangsverteilung der Stufenversetzungen, Strukturbildung.

Bild 13 stellt die Relaxation einer Zufallsanfangsverteilung von je 4000 positiven und negativen Stufenversetzungen in einem Feld von $10\ \mu\text{m} \times 8\ \mu\text{m}$ (Skalenfaktor 1250 Zellen pro μm) nach jeweils 1000 Zeitschritten bei vernachlässigbarer Reibkraft in Gleitrichtung dar. Links ist eine Wechselwirkungsreichweite von $\pm 0,8\ \mu\text{m}$, rechts eine solche von $\pm 2\ \mu\text{m}$ in vertikaler Richtung vorgegeben. Es bilden sich bei hoher Wechselwirkungsreichweite in Vertikalrichtung ausgeprägte monopolare Mauern aus.

In Bild 14 ist der Verlauf der erforderlichen äußeren Schubspannung über dem Abgleitwinkel bei dehnungsgesteuerter zyklischer Simulation nach monotoner Vorverformung dargestellt. Man erkennt Bauschinger-Effekt und zyklische Entfestigung.

Eine realistischere Simulation der Bildung von Versetzungsstrukturen erhält man durch Modelle, die mehrere Gleitebenen berücksichtigen. Bild 15 zeigt das Gleitsystem, das für kubisch flächenzentrierte Gitteraufbau vorliegt. Bild 16 stellt die Wiedergabe der Gleitvorgänge auf diesem System mit drei Gleitrichtungen jeweils im Winkel von 60° zueinander dar.

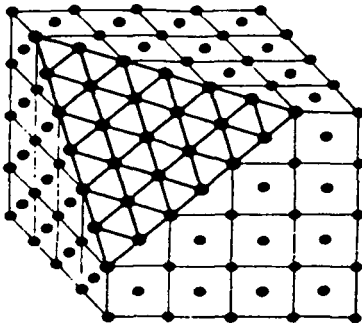


Bild 15
Gleitsystem für kubisch-
flächenzentrierte Kristalle

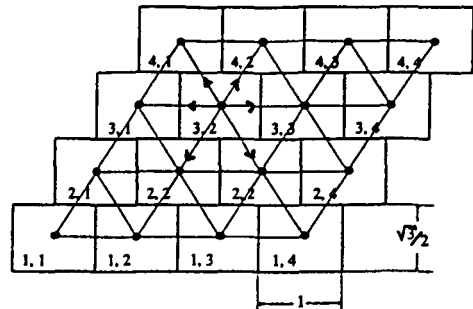


Bild 16
Zellulärer Automat mit drei Gleitrichtungen

Die Kräftebilanz setzt sich hierbei aus den aus der Wechselwirkung mit anderen Versetzungen stammenden Kräften

$$\underline{F}^i = \sum_j (\underline{\sigma}^j \cdot \underline{b}) \times \underline{\xi} \quad (15)$$

den äußeren Kräften \underline{F}^a und einer durch die Gitterstruktur vorhandenen Reibkraft \underline{F}^r zusammen. Sobald sich die Gesamtkraft

$$\underline{F}^{ges} = \underline{F}^i + \underline{F}^a - \underline{F}^r \quad (16)$$

als größer Null ergibt, wird angenommen, daß sich die Versetzung bewegt.

Man erkennt aus den Bildern 17 und 18, daß die Simulation eine Mauern- bzw. Zellstruktur der Versetzungen ergibt.

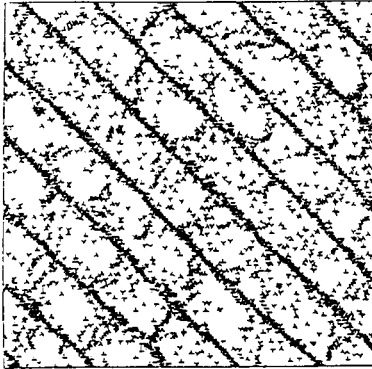


Bild 17
Simulationsergebnis, Bildung von
Mauern

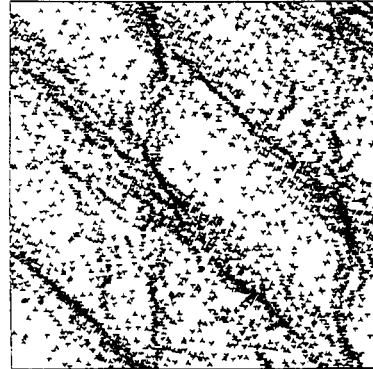


Bild 18
Simulationsergebnis, Bildung von Zellen

Eine Erweiterung dieses Modells mit Berücksichtigung von Fremdatomen, Leerstellen und einem geeigneten Geschwindigkeitsgesetz wird zur Zeit vorgenommen. Dabei wird der Parallelisierung der Berechnungsalgorithmen besondere Aufmerksamkeit geschenkt.

Zusammenfassung

Die Berücksichtigung von Vorgängen im Mikrobereich kristalliner Werkstoffe kann auf verschiedenen Größenskalen untersucht werden. Geht man von einer Skala aus, in der die Prozesse durch Aktivierungsvolumina und Aktivierungsenergien in Form von thermischen und mechanischen Aktivierungsprozessen dargestellt werden, so lassen sich die stochastischen Eigenschaften der Vorgänge über stochastische Prozesse beschreiben, mit denen durch Mittelwertbildung ein Übergang auf makroskopische Stoffgesetze möglich ist.

Zur Unterstützung dieser Modellbildung können Simulationen der Prozesse im Mikrobereich nützlich sein, bei denen wegen des Vielteilchencharakters der Vorgänge Modelle in Form zellulärer Automaten und molekulardynamische Ansätze hergezogen werden können.

Danksagung

Die Untersuchungen wurden von der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 319 „Stoffgesetze für das inelastische Verhalten metallischer Werkstoffe – Entwicklung und technische Anwendung“ gefördert, der hierfür gedankt sei. Wesentliche Beiträge wurden von den Mitarbeitern des Instituts für Allgemeine Mechanik und Festigkeitslehre der Technischen Universität Braunschweig Dr.-Ing. Hanfried Hesselbarth und Dipl.-Ing. Daryoush Sangi geleistet.

Literatur

- 1 Guy, A.G., G. Petzow: Metallkunde für Ingenieure, Akademische Verlagsgesellschaft Wiesbaden, 1983.
- 2 Steck, E.: A Stochastic Model for High-Temperature Plasticity of Metals, Int. J. of. Plasticity 1, 1985.
- 3 Schlums, H.: Ein stochastisches Werkstoffmodell zur Beschreibung von Kriechen und zyklischem Verhalten metallischer Werkstoffe, Braunschweig Series on Mechanics, No. 5–1992, Mechanik-Zentrum, Technische Universität Braunschweig.
- 4 Thielecke, F.: Untersuchung von Verfahren zur Parameteranpassung bei Stoffgesetzen für inelastisches Verhalten metallischer Werkstoffe, Diplomarbeit, Institut für Allgemeine Mechanik und Festigkeitslehre der TU Braunschweig, 1992.
- 5 Wolfram, S.: Universality and complexity in cellular automata, Physica 10 D, 1984, 1–35.
- 6 Hesselbarth, H.: Simulation von Versetzungsstrukturbildung, Rekristallisation und Kriechschädigung mit dem Prinzip der zellulären Automaten, Braunschweig Series on Mechanics, Nr. 4–1992, Mechanik-Zentrum, Technische Universität Braunschweig.
- 7 Von Neumann, J.: Theory of self-reproducing automata (Hrsg.: A.W. Burks) University of Illinois Press, Urbana, 1966.

Professor Dr.-Ing. Elmar Steck

Institut für Allgemeine Mechanik und Festigkeitslehre der Technischen Universität Braunschweig
Gaußstraße 14 · 38106 Braunschweig